

# **BAB I**

## **PENDAHULUAN**

### **A. Latar Belakang**

Ilmu kimia merupakan bagian ilmu pengetahuan alam yang sebagian besar diperoleh berdasarkan pada eksperimen. Perkembangan dalam ilmu kimia saat ini, prediksi teoritis sifat-sifat kimia bisa menyaingi keakuratan data-data yang diperoleh dari eksperimen (grant dan Richards, 1995).

Pesatnya perkembangan teknologi dan informasi turut mempengaruhi perkembangan ilmu kimia. Salah satu perkembangan tersebut yakni dengan adanya penggunaan komputer sebagai sarana atau peralatan dalam kerja laboratorium kimia. Penggunaan komputer sebagai alat bantu kerja telah dikembangkan menjadi suatu aspek kajian yang disebut dengan kimia komputasi. Perkembangan kimia komputasi yang sangat pesat telah mengubah deskripsi suatu sistem kimia dengan masuknya unsur baru antara eksperimen dengan teori yaitu eksperimen komputer. Dalam eksperimen, pengukuran sistem dinyatakan dalam bentuk hasil eksperimen, sedangkan dalam teori menggunakan persamaan matematik untuk menyusun model suatu sistem umumnya. Jadi kimia komputasi merupakan jembatan yang menghubungkan hasil-hasil eksperimen di laboratorium dengan landasan teori.

Penelitian-penelitian yang dilakukan oleh para peneliti terdahulu, menjelaskan bahwa suatu logam yang ada di dalam tubuh manusia memiliki suatu fungsi tertentu, baik itu yang bisa menguntungkan misalnya dalam proses metabolisme ataupun yang merugikan bagi tubuh (Siu dkk., 2002), sebagai antibodi dan lainnya. Suatu unsur yang termasuk golongan logam berat seperti kadmium (Cd), arsen (As), merkuri (Hg), nikel (Ni), timbal (Pb) dan seng (Zn) (Bogdan et al., 2011) terdapat dalam lingkungan baik di udara, air maupun makanan (Cotruvo et al., 2011) dan bisa masuk kedalam tubuh manusia maupun hewan. Dalam tubuh makhluk hidup ion logam berat jumlahnya sangat sedikit atau disebut “trace”. Beberapa mineral trace ada yang berupa esensial dan non-esensial. Mineral esensial digunakan untuk aktivitas kerja sistem enzim, misalnya: seng (Zn), tembaga (Cu), besi (Fe), kobalt (Co), dan mangan (Mn) (Darmono, 2004: 94-96).

Unsur-unsur logam dalam tubuh kita memiliki peranan yang cukup penting dalam proses metabolisme. Kelimpahan Zn di dalam tubuh manusia termasuk kedua terbesar dari seluruh logam transisi setelah besi. Pada kondisi fisiologis Zn berada dalam keadaan kation divalen, baik yang merupakan kation bebas dalam pelarut maupun yang terikat dengan molekul lainnya. Zink memiliki fungsi khusus yang cukup penting sebagai katalis untuk beberapa reaksi kimia dan biologis. Fungsi khususnya ini sangat berkaitan dengan kemampuan pembentukan konformasi struktural tertentu dari suatu protein (Kaim dan Schwederski, 1994).

Ikatan kimia yang terjadi antara zink dan molekul biologis merupakan ikatan koordinasi pada gugus fungsi rantai samping asam amino khususnya pada proton asamnya (Yazal dan Pang, 2000). Rulisek dan Havlas (1999) telah melakukan pemodelan interaksi ion  $\text{Zn}^{2+}$  dengan beberapa residu asam amino sebagai struktur solvasi. Dari penelitian terbesut diketahui bahwa jarak logam-ligan dan energi kompleks hidrat monosubstitusi sangat tergantung pada jumlah ligan pada lingkungan koordinasi pertama geometri koordinasinya.

Peristiwa solvasi melibatkan beberapa lapisan larutan yang disebut dengan sel pelarutan. Lapisan paling dekat dengan kation logam merupakan lapisan (sel) pertama, lapisan selanjutnya disebut dengan lapisan kedua, dan seterusnya hingga sampai fasa ruah. Fasa ruah merupakan lapisan yang tidak dipengaruhi oleh kekuatan muatan kation. Dalam fasa ini hanya terjadi solvasi antar pelarut saja (Armuntanto dkk.,2004).

Zat terlarut yang berada dalam lapisan pertama memiliki daya hidrasi yang cukup kuat. Zat terlarut ini merupakan ligan yang terhidrasi dengan ion pusat (kation). Ligan yang berada dalam lapisan pertama dapat berpindah ke lapisan kedua dan sebaliknya. Pertukaran ligan dapat mempengaruhi aktivitas. Dengan menggunakan bantuan komputer dan program perangkat lunak yang semakin maju seperti saat ini dapat menjadi dasar dilakukannya penelitian yang mengkaji lebih dalam mengenai hidrasi ataupun solvasi (Pranowo dan Rode, 2001).

Secara garis besar struktur dan dinamika hidrasi dapat ditentukan melalui eksperimen dan simulasi komputer. Secara eksperimen dapat dilakukan dengan memakai peralatan seperti: difraksi sinar-X, difraksi sinar neutron, spektroskopi dan NMR. Sedangkan yang menggunakan simulasi dapat dilakukan dengan dua cara yaitu simulasi Monte Carlo (MC) dan Molecular Dynamics (MD) (Pranowo dan Hetadi, 2011).

Simulasi dinamika molekuler yang kemudian dikembangkan adalah simulasi dinamika molekuler mekanika kuantum. Simulasi molekuler mekanika kuantum ini terbukti memiliki keakuratan yang tinggi. Hasil analisis yang diperoleh tidak menyimpang jauh dengan hasil eksperimen. Namun demikian, simulasi dinamika molekuler mekanika kuantum membutuhkan spesifikasi komputer yang tinggi, sehingga memerlukan biaya dan waktu komputasi yang lama. Kemudian dari DM/MK dikembangkan lebih lanjut menjadi simulasi DM dengan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan metode perhitungan *ab initio Quantum Mechanics*/Mekanika Molekul atau dikenal dengan QM/MM (Rode, B.M dan Hofer, 2006).

Peran basis set dalam penelitian menggunakan simulasi dinamika molekuler termasuk penting agar dapat menentukan dinamika atau struktur suatu molekul. Semakin besar basis set maka akan lebih akurat dalam mendeskripsikan orbital karena elektron lebih leluasa bergerak alias tidak terbatas pada suatu ruang tertentu. Untuk menentukan basis set perlu juga diperhatikan nilai BSSE (*Basis Set Superposition Error*). Semakin rendah

nilai BSSE maka semakin tepat pemilihan basis set untuk unsur tersebut. Karena Zn termasuk dalam logam transisi, maka penggunaan himpunan basis ECP memiliki banyak keuntungan karena himpunan basis ini memasukkan perhitungan faktor relativitas dan mereduksi sejumlah integral sehingga membutuhkan waktu perhitungan yang lebih singkat.

Ion zink ( $\text{Zn}^{2+}$ ) dapat mengikat molekul air, ammonia atau pelarut yang lain. Jika ion  $\text{Zn}^{2+}$  mengikat pelarut air maka disebut hidrasi. Oleh karena itu penelitian ini dilakukan untuk mengetahui struktur ion  $\text{Zn}^{2+}$  yang mengikat molekul air sebagai ligan menggunakan metode simulasi dinamika molekul mekanika molekul (DM/MM). Dipilihnya metode mekanika molekul karena metode ini lebih irit waktu sehingga metode mekanika kuantum tidak digunakan, sedangkan atom Zn dipilih karena logam zink merupakan salah satu logam yang sering digunakan di dunia industri sehingga pengetahuan yang lebih mengenai zink tentunya diperlukan.

## **B. Identifikasi Masalah**

Berdasarkan uraian latar belakang, maka identifikasi masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Pemilihan basis set Zn yang tepat agar hasil simulasi sesuai dengan eksperimen.
2. Struktur dan dinamika dari ion  $\text{Zn}^{2+}$  dengan molekul air.

## **C. Pembatasan Masalah**

Berdasarkan permasalahan yang telah disebutkan, maka perlu

dibatasi. Pembatasan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Pemilihan basis set ECP untuk Zn seperti LANL2DZ, LANL2TZ, LANL08, dan CRENBL.
2. Struktur dan dinamika dari ion  $\text{Zn}^{2+}$  dengan molekul air menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul.

#### **D. Rumusan Masalah**

Berdasarkan latar belakang diatas, dapat dirumuskan permasalahan sebagai berikut:

1. Bagaimana struktur hidrasi ion  $\text{Zn}^{2+}$  dengan menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul?
2. Bagaimana dinamika hidrasi ion  $\text{Zn}^{2+}$  dengan menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul?

#### **E. Tujuan Penelitian**

Dari perumusan masalah diatas, tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Mengetahui struktur hidrasi ion  $\text{Zn}^{2+}$  menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul.
2. Mengetahui dinamika hidrasi ion  $\text{Zn}^{2+}$  menggunakan simulasi dinamika molekul mekanika molekul.

#### **F. Manfaat Penelitian**

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan sumbangan yang bagi pengembangan ilmu dalam bidang kimia komputasi. Dengan dilakukan penelitian ini maka sifat struktur dan dinamika hidrasi  $\text{Zn}^{2+}$  dapat diketahui